



Posudek na habilitační práci "Modelování fyzikálně-chemických vlastností bioanorganických systémů" Mgr. Lubomíra Rulíška, CSc. DSc.

Předložená habilitační práce popisuje nejvýznamnější studie Dr. Rulíška na poli bioanorganické chemie. Studované systémy jsou rozděleny do pěti základních bloků, v nichž se postupně stručně zmiňuje o nejdůležitějších výsledcích. Po úvodní části, která ukazuje na propojení experimentů a výpočetních přístupů, postupně diskutuje získané výsledky v oblasti i) reakčních mechanismů metaloproteinů, ii) komplexace kovových kationtů v modelech existujících peptidových a proteinových struktur, iii) výpočetní elektrochemie, iv) návrhů nových peptidových sekvencí s navázanými kovovými ionty a v) metodologických přístupů aplikovaných v bioanorganické chemii.

V první části jsou převážně zmiňovány výsledky enzymu zvaného "multi-copper oxidase", které obsahuje komplex tří atomů mědi (trinuclear copper cluster) v jehož blízkosti (ca 13 Å) se nachází další kation mědi. Nalezení věrohodného mechanismu oxidace takto složitěho systému je velmi komplikovaný problém, kterého se tým Dr. Rulíška a jeho zahraničních spolupracovníků úspěšně zhostili. Druhý projekt z této části se zabývá Δ^9 desaturázou, kde na reakční mechanismus ne-hemového enzymu se dvěma atomy železa aplikovaly sadu DFT funkcionalů a DMRG-CASSCF/PT2 metodu.

K této části bych měl dva dotazy do diskuze:

- 1) na str. 13 v popisu obrázku 3 je zmíněno neutrální pH prostředí (pH=7). Jak se tato skutečnost odrazila ve výpočetním modelu daného systému?
- 2) Na obrázku 5A jsou zobrazeny energetické křivky pro jednotlivé DFT funkcionaly a DMRG metodu. V původním článku je řečeno, že DMRG-CASPT2 nabývá přesnosti full-CI. Nabízí se tedy spekulace, že by měla být přesnější než metoda vázaných klastrů? A nezkoušeli autoři použít CCSD(T) přístup alespoň pro nějaký modelový systém a porovnat jej s DMRG metodou?
- 3) V návaznosti na kapitulu 6 bych se zeptal, jakým směrem se chystá autor orientovat v svém dalším výzkumu a jaká zdokonalení výpočetních metod do budoucna očekává?

Habilitační práce zcela jasně ukazuje na značný přínos Dr. Rulíška v oblasti výpočtů (relativně rozsáhlých) bioanorganických systémů a na jeho vědeckou vyzrálost. Předložených 20 originálních prací představuje pouze malou část jeho celkové publikační aktivity. Nicméně i z tohoto vzorku je patrné, že jde o velice kvalitní studie uveřejněné v prestižních mezinárodních časopisech.

Protože titul docenta je však spojen s pedagogickou aktivitou je rovněž nutné se zmínit o žadatelově činnosti na tomto poli. Na internetu jsem si vyhledal, že i tato stránka nezaostává za výzkumnou činností a je úspěšně naplněna magisterským kurzem „Chemická struktura B“ přednášeným na zdejší fakultě (pod kódem MC260P1 1M).

Na základě všech výše uvedených skutečností plně doporučuji udělení titulu docent.

V Praze 5.10.2018

Prof. RNDr. Ing. Jaroslav Burda, DrSc.
Katedra chemické fyziky a optiky
Matematicko-fyzikální fakulta
Univerzita Karlova v Praze